

**Beschreibung****Verfahren zur Bestimmung der Farbwahrnehmung bei Mehrschichtsystemen**

Die Erfindung bezieht sich auf Verfahren zur Bestimmung der Farbwirkung von streuenden Materialien wie Werkstoffen oder biologischen Substanzen eines Mehrschichtsystems, insbesondere einer Schichtabfolge in Zähnen oder dentalen Werkstoffen.

Ein Ziel der Bestimmung der Farbwahrnehmung ist eine Anpassung oder ein Abgleich der Farbwirkung von neuen Mehrschichtsystemen an vorhandene Mehrschichtsysteme, beispielsweise als Maßnahme der Qualitätssicherung oder bei der Entwicklung und Beurteilung neuer Materialien und deren Kombinationen. Dies gilt für Mehrschichtsysteme im Bereich von kosmetischen oder ästhetischen medizinischen Anwendungen, wie z. B. für Zahnersatz, bis hin zu technischen Gebieten, wie z. B. für Autolacke oder Kunststoffe. Die Farbwirkung eines Materialsystems ist abhängig von der Schichtdicke und der Rückstreuung (Remission) des Lichts und kann gemäß DIN 5033 nach dem Gleichheits-, Dreibereichs- oder Spektralverfahren nach unterschiedlichen Farbsystemen, wie z. B. CIELAB oder CIELUV, ermittelt werden. Genutzt werden beispielsweise Messgeräte wie Farbspektrometer oder Colorimeter sowie eine visuelle Abmusterung beispielsweise mittels spezieller Farbskalen, wie diese z. B. für den Bereich Zahnmedizin in der DE-A-196 46 923, der DE-A-101 21 553 oder der DE-A-100 23 840 beschrieben werden.

Aufgrund des bei Mehrschichtsystemen durchzuführenden technischen Herstellungsprozesses sowie der Kombination von Einzelschichten kann die Farbwirkung nicht direkt verglichen, sondern erst im nach hinein, also nach Fertigstellung bestimmt und beurteilt werden, wenn keine Farbkorrektur mehr möglich ist.

Um eine gewünschte Farbwirkung zu erreichen und die jeweilige Farbwirkung bei variierenden Schichtdicken zu bestimmen oder vorauszusagen, sind daher meist zeit- und kostenaufwändige Mess- und Versuchsreihen seitens des Herstellers erforderlich, auch nach dem Prinzip trial and error. Um dies zu vermeiden, wird versucht, die Farbwirkung mit Hilfe von Simulationen zu berechnen. Dies kann für Einzelschichten und weniger komplexe Materialsysteme, die aufgrund ihrer als relativ homogen anzusehenden inneren Struktur nur eine molekulare Streuung aufweisen, mit ausreichender Genauigkeit durchgeführt werden.

Eine solche Berechnung zur Vorhersage der Farbwirkung für unterschiedliche Schichtdicken wird - sowohl auf dem Gebiet der zahnmedizinischen Wissenschaft als auch im technischen Bereich wie in der Farbindustrie als Basis von, beispielsweise konzentrationsabhängigen, Farbrezeptierungsberechnungen - bisher mit Hilfe der als Stand der Technik geltenden und verwendeten Kubelka-Munk-Gleichung als eindimensionalem Modell zur Lösung der Strahlungstransportgleichung durchgeführt. Aus an Materialproben gemessenen Transmissions- oder Remissionseigenschaften werden damit der Absorptionskoeffizient  $A_{KM}$  und Streukoeffizient  $S_{KM}$  berechnet. Auf Basis von  $A_{KM}$  und  $S_{KM}$  können die Remissionsspektren für verschiedene Schichtdicken vorhergesagt werden, beispielsweise vor weißem oder schwarzem oder vor nach einem Farbsystem definiertem Hintergrund. Aus den Remissionsspektren lässt sich die Farbwirkung je nach angewandtem Farbsystem berechnen. Beispielsweise kann die Berechnung der Farbwirkung nach CIELAB nach der Norm DIN 5033 durch Umrechnung der Remissionswerte in X, Y, Z-Normfarbwerte und nachfolgend in CIELAB-Werte ermittelt werden. Diese Umrechnung von gemessenen Remissionswerten in CIELAB-Werte ist auch in die Software von Farbspektrometern, wie sie in der Farbindustrie angewendet werden, integriert. Durch Vergleich der CIELAB-Werte und Berechnung des Farbabstands  $\Delta E_{ab}$  nach DIN-Norm 6074 können Farbunterschiede zwischen Proben der untersuchten Materialien ermittelt werden.

Mit der Kubelka-Munk-Gleichung können jedoch die Messgeometrien der für die Transmissions- oder Remissionsmessungen verwendeten Messgeräte nicht berücksichtigt werden und es werden vereinfachende, der Genauigkeit abträgliche, Annahmen ge-

troffen. Damit entstehen systematische Fehler, die sich in sichtbaren Farbunterschieden zwischen Simulationsergebnis und Wirklichkeit bemerkbar machen können. Der größte Nachteil der Kubelka-Munk-Theorie besteht jedoch darin, dass nur Vorgänge der Oberflächenreflexion berücksichtigt werden können. Dies wird in Fig. 1 beispielhaft am Lichtweg eines Photons 1 nach Reflexion des Lichts an der Oberfläche einer Materialschicht 2 vorgegebener Dicke dargestellt ist.

Mit der Kubelka-Munk-Gleichung können bei Mehrschichtsystemen, bei denen nicht molekulare, sondern strukturelle Streugeometrien vorliegen, die tatsächlich vorliegenden Verhältnisse nicht mehr korrekt wiedergegeben werden. Denn hierbei kommt es durch den Schichtaufbau und die Strukturbesonderheiten zu einer Lichtausbreitung mit internen Vielfachstreuovorgängen im Material oder Werkstoff. Die Remission und damit die Farbwirkung ergeben sich aus einem sehr komplexen Zusammenspiel der optischen Eigenschaften der unterschiedlichen Inhaltsstoffe und Komponenten der Schichten aufgrund der Lichtausbreitung durch Streuung, Absorption und Brechung an Grenzschichten. Fig. 2 zeigt beispielhaft den Lichtweg eines Photons 1 sowie einen alternativen Lichtweg 1' nach multiplen Streuereignissen innerhalb mehrerer hintereinander liegender Materialschichten 2, 3, 4 unterschiedlicher Dicke und Art. Bei Anwendung der Kubelka-Munk-Gleichung sind daher für Mehrschichtsysteme mit Strukturstreuung wesentliche Abstriche bei der Genauigkeit der Vorhersage der Remission und somit der Farbwirkung hinzunehmen, die sich als visuell wahrnehmbare Unterschiede bemerkbar machen. Zur Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit der Remission und damit der Farbwirkung ist daher die Entwicklung eines Verfahrens erforderlich, das diese strukturell bedingte Vielfachstreuung korrekt und genau berücksichtigen kann.

Der vorliegenden Erfindung liegt das Problem zu Grunde, dass die Farbwahrnehmung für Mehrschichtsysteme aus Kombinationen verschiedener streuender Werkstoffe oder biologischer Materialien aus zusammengesetzten, unterschiedlichen Schichten mit verschiedenen optischen Eigenschaften für variierende Schichtdicken genauer als bisher berechnet und damit vorhergesagt werden kann, ohne jeweils immer wieder Proben, bestehend aus den kombinierten interessierenden Schichtdicken, herstellen und deren

Farbwirkung, beispielsweise in konventionellen Farbspektralphotometern, messen zu müssen.

Insbesondere soll die Farbwahrnehmung für Mehrschichtsysteme im dentalen Bereich berechnet bzw. vorhergesagt werden, wobei Schichtabfolgen in Zähnen wie Schmelz und Dentin in beliebiger Schichtstärke und dentale Werkstoffe wie Komposita und Keramiken von besonderem Interesse sind.

Zur Lösung des Problems sieht die Erfindung im Wesentlichen vor, dass mittels Monte-Carlo-Simulationen auf der Basis jeweiliger intrinsischer optischer Parameter der unterschiedlichen Materialien des Schichtsystems umfassend Streukoeffizient  $\mu_s$ , Anisotropiefaktor  $g$  und korrigierter Absorptionskoeffizient  $\mu_{ak}$  und unter Einbeziehung von jeweils Brechungsindex  $n$ , Dicke  $d$  der jeweiligen Schicht sowie Streuphasenfunktion der einzelnen Materialien die Remission des Mehrschichtsystems berechnet wird.

Dabei können die intrinsischen optischen Parameter auf Basis von spektrometrischen Messungen ermittelt oder aus einer Datenbank entnommen werden.

Erfindungsgemäß wird ein Verfahren vorgeschlagen, mit dem die visuelle Wahrnehmung der Farbe von Mehrschichtsystemen oder die Ergebnisse deren messtechnischer Erfassung, wie beispielsweise durch Farbspektrometer, ausreichend genau bestimmt bzw. vorhergesagt werden können. Es hat sich überraschenderweise gezeigt, dass bei Vorliegen von strukturellen Streugeometrien in Mehrschichtsystemen mit Simulationsrechnungen nach dem Prinzip der Monte-Carlo-Simulation als dreidimensionalem Lösungsansatz der Strahlungstransportgleichung und eines anschließenden speziellen Korrekturverfahrens eine korrekte und wesentlich genauere Bestimmung der Farbwahrnehmung als bisher möglich ist.

Als Ausgangsdaten für die erfundungsgemäße Lösung dienen die optischen Eigenschaften der jeweiligen im Mehrschichtsystem enthaltenen Werkstoffe oder biologischen Materialien in Form der intrinsischen optischen Parameter Absorptionskoeffizient  $\mu_a$ , Streukoeffizient  $\mu_s$  und Anisotropiefaktor  $g$ .

Zur Ermittlung der intrinsischen optischen Parameter - auch bezeichnet als mikroskopische Parameter -, die unabhängig von der Materialdicke sind, können Verfahren zur Anwendung gelangen, die aus der Gewebeoptik für Dosimetrieberechnungen bei medizinischen Lasertherapien bekannt sind. So kann mit Hilfe einer inversen Monte-Carlo-Simulation aus den in einem Ulbricht-Kugel-Spektrometer an Proben mit einer zuvor ermittelten geeigneten Probendicke  $d$  gemessenen makroskopischen optischen Parametern wie der diffusen Remission  $R_d$ , der totalen Transmission  $T_t$  sowie der diffusen Transmission  $T_d$  oder der kollimierten Transmission  $T_c$  eine Berechnung erfolgen.

Insbesondere ist vorgesehen, dass die intrinsischen optischen Parameter Streukoeffizient  $\mu_s$ , (unkorrigierter) Absorptionskoeffizient  $\mu_a$  sowie Anisotropiefaktor  $g$  eines Materials auf der Basis der makroskopischen optischen Parameter des Materials in Form von insbesondere diffuser Remission  $R_d$ , diffuser Transmission  $T_d$  und/oder totaler Transmission  $T_t$  und/oder kollimierter Transmission  $T_c$  unter Berücksichtigung der Streuphasenfunktion des Materials, Dicke  $d$  einer bei der Bestimmung der makroskopischen Parameter verwendeten Schicht des Materials und Brechungsindex  $n$  des Materials mittels inverser Monte-Carlo-Simulation berechnet werden.

Sodann kann für jedes Material auf der Basis der beiden intrinsischen optischen Parameter Streukoeffizient  $\mu_s$  und Anisotropiefaktor  $g$  sowie der Remission einer aus dem Material bestehenden optisch dichten Schicht einer Dicke  $d_D$  und unter Berücksichtigung zumindest der Dicke  $d_D$ , der Streuphasenfunktion und des Brechungsindex  $n$  des Materials mittels inverser Monte-Carlo-Simulation der korrigierte Absorptionskoeffizient  $\mu_{ak}$  berechnet werden. Der Streukoeffizient  $\mu_s$  sowie der Anisotropiefaktor  $g$  sind bereits aus zuvor erfolgter Berechnung bekannt.

Mit anderen Worten erfolgt erfundungsgemäß eine Korrektur des berechneten Absorptionskoeffizienten  $\mu_a$  mit Hilfe der Remissionswerte einer optisch dichteren Probe der Probendicke  $d_D$  des zu untersuchenden Materials zusammen mit den ermittelten Werten von  $\mu_s$  und  $g$  in einer erneuten inversen Monte-Carlo-Simulation zum korrigierten Absorptionskoeffizient  $\mu_{ak}$ . Durch diesen Schritt wird die Genauigkeit der Berechnung der Farbwirkung wesentlich erhöht.

Die Absorption kann umso genauer bestimmt werden, je größer die Dicke einer Schicht ist. Für die Bestimmung der Ausgangsdaten  $\mu_a$ ,  $\mu_s$  und  $g$  kann jedoch bei der spektrometrischen Messung keine optisch dichte Probe verwendet werden, da für diesen Simulationsvorgang ein gewisser Prozentsatz an kollimierter Transmission, also Lichtdurchlässigkeit, erforderlich ist.

Die Daten zu den intrinsischen optischen Parametern können in Erweiterung des Erfindungsgedankens materialabhängig in einer Datenbank bereitgestellt werden. Mit dem Aufbau einer solchen Datenbank, die die intrinsischen optischen Parameter  $\mu_{ak}$ ,  $\mu_s$  und  $g$  für unterschiedliche Materialien oder biologische Substanzen oder dentale Materialien enthält, kann auf diese Werte zurückgegriffen werden, so dass bei Verwendung dieser Materialien in einem Mehrschichtsystem für die Bestimmung von dessen Farbwirkung keine spektrometrischen Messungen mehr erforderlich sind.

Nachfolgend lassen sich auf der Basis von  $\mu_{ak}$ ,  $\mu_s$  und  $g$  durch eine Vorwärts-Monte-Carlo-Simulation die Remission für ein Mehrschichtsystem bei einer wählbaren Wellenlänge und jeweils wählbaren Dicken der im Mehrschichtsystem enthaltenen Schichten berechnen. Anstelle der Remission ist auch die Berechnung der Transmission möglich. Die wellenlängenabhängigen Werte der Remission können mittels geeigneter Algorithmen in Farbwerte wie z. B. die Koordinaten nach CIELAB oder anderer Farbsysteme transformiert werden. Möglich ist auch die Anwendung der Multifaktorenanalyse zur Ermittlung der Farbwirkung nach neuen, alternativen Farbsystemen.

Die Berechnung der Farbwirkung ist außerdem für unterschiedliche und frei wählbare Messgeometrien möglich.

Mit dem beschriebenen Vorgehen kann damit die Farbwirkung für ein Mehrschichtsystem als Kombination von verschiedenen Materialien wie biologische Materialien oder insbesondere zahnmedizinische oder -technische Schichtabfolgen für varierende Schichtdicken der Einzelschichten mit sehr viel höherer Genauigkeit als bisher bestimmt werden, da zum einen die in den unterschiedlichen Schichten durch die interne

Strukturstreuung hervorgerufenen multiplen Streuereignisse korrekt berechnet werden können und die Genauigkeit zum anderen durch die Bestimmung des korrigierten Absorptionskoeffizienten  $\mu_{ak}$  weiter erhöht wird. Somit ist es möglich, die Farbwirkung für Mehrschichtsysteme so genau vorherzubestimmen, dass keine visuellen Unterschiede mehr wahrgenommen werden. Damit kann bei bekanntem Materialverhalten schon vor der Herstellung eines Mehrschichtsystems dessen Farbwirkung für wählbare Schichtdickenzusammensetzungen präzise vorhergesagt werden. Außerdem kann die Messgeometrie berücksichtigt werden und somit auch das Ergebnis von schichtdickenabhängigen Messungen in unterschiedlichen Spektrometern, beispielsweise von Remissionsmessungen in Farbspektrometern vorhergesagt werden.

Besonders geeignet ist das Verfahren für die Anwendung bei Mehrschichtsystemen in der Zahnmedizin für die Ermittlung der Farbe von dentalen Restaurationsmaterialien und Zahnfarbe, bei denen aufgrund der zu unterscheidenden sehr feinen Farbabstufungen von beispielsweise rötlichem, gelblichem oder gräulichem Weiß eine besonders hohe Genauigkeit erforderlich ist. Sowohl Zähne, als auch Zahnersatzmaterialien zeigen einen Schichtaufbau und komplexe innere Streugeometrien aufgrund ihrer strukturellen Zusammensetzung. Zähne bestehen aus den Zahnhartsubstanzen Schmelz und Dentin mit Prismen- bzw. röhrchenartiger Tubulstruktur, Zahnersatzmaterialien werden zur Nachahmung des resultierenden optischen Eindrucks für eine optimale Ästhetik ebenfalls aus Schichten unterschiedlicher Opazität zusammengesetzt mit einem komplexen Aufbau aus in einer Matrix eingelagerten Füllkörpern unterschiedlichster Art und Formen.

Das beschriebene Verfahren, das sich dadurch auszeichnet, dass die Berechnung der Remission für Mehrschichtsysteme mit hintereinander liegenden unterschiedlichen Materialschichten wählbarer Schichtdicke und Eigenschaften mittels Monte-Carlo-Simulationen auf Basis der intrinsischen optischen Parameter mit einem korrigierten Absorptionskoeffizient  $\mu_{ak}$ , Streukoeffizient  $\mu_s$  und Anisotropiefaktor  $g$  sowie des Brechungsindex  $n$  und der Einbeziehung der Streuphasenfunktion zur Berücksichtigung der internen Vielfachmaterialstreuung erfolgt, ist jedoch auf alle anderen Mehrschichtsysteme mit Strukturstreuung, sowohl im Bereich biologischer als auch technischer oder

anderer Systeme anwendbar. Dabei kann auch die Farbwirkung von z. B. nicht in einer geraden sondern in einer gekrümmten Ebene verlaufenden Schichten berechnet bzw. vorhergesagt werden.

Weitere Einzelheiten, Vorteile und Merkmale der Erfindung ergeben sich aus den Ansprüchen, den diesen zu entnehmenden Merkmalen -für sich und/oder in Kombination-, sondern auch aus der nachfolgenden Beschreibung von der Zeichnung zu entnehmenden Ausführungsbeispielen.

Es zeigen:

Fig. 1 eine schematische Darstellung eines Lichtwegs nach Oberflächenreflexion an einer Materialschicht,

Fig. 2 schematische Darstellungen von Lichtwegen in Materialschichten,

Fig. 3 eine Prinzipdarstellung eines Probenraums mit Ulbricht-Kugel,

Fig. 4 ein Ablaufdiagramm zur Berechnung intrinsischer optischer Parameter,

Fig. 5 ein Ablaufdiagramm zur inversen Monte-Carlo-Simulation und

Fig. 6 ein Ablaufdiagramm zur Berechnung der Remission und nachfolgend der Farbwirkung eines Mehrschichtsystems.

Um die Farbwirkung von streuenden Schichten unterschiedlicher Materialien auf der Basis von Remissionsspektren zu bestimmen, werden erfundungsgemäß intrinsische (mikroskopische) optische Parameter Absorptionskoeffizient  $\mu_a$ , Streukoeffizient  $\mu_s$ , Anisotropiefaktor  $g$  der Materialien ermittelt - sei es aufgrund von Berechnungen auf der Basis von experimentell ermittelten makroskopischen optischen Parametern, sei es unter Berücksichtigung von von Datenbanken zu entnehmenden Werten -, auf deren Basis Monte-Carlo-Simulationen durchgeführt werden. Bei der Monte-Carlo-Simulation

handelt es sich um ein für die Lösung von Gleichungssystemen und statistischen Prozessen angewendetes numerisches Verfahren mit hoher Genauigkeit.

So können mittels einer inversen Monte-Carlo-Simulation mit Hilfe einer z. B. von Roggan entwickelten Simulationssoftware WinFit 32, Version 5.2. intrinsische optische Parameter auf der Basis gemessener makroskopischer optischer Parameter berechnet werden. Zur Messung der makroskopischen optischen Parameter kann ein Ulbricht-Kugel-Spektrometer in Form eines Zweistrahl-Spektrometers benutzt werden, wie dies prinzipiell der Fig. 3 zu entnehmen ist.

So ist in Fig. 3 ein Probenraum 10 dargestellt, in dem eine Ulbricht-Kugel 12 angeordnet ist. Ferner sind Referenzstrahl 14 und Probenstrahl 16 eingezeichnet. Der Referenzstrahl 14 wird über Spiegel S3', S4' und S5' in die Ulbricht-Kugel 12 zur Kalibrierung auf einen Referenzstandard 18 geführt. Ulbricht-Kugel 12 und Referenzstandard 18 können aus Spektralon bestehen, wodurch eine 99,8 % ige Reflexion des Lichts für eine nahezu verlustfreie Detektion der Photonen ermöglicht wird.

Der Probenstrahl 16 gelangt über Spiegel S1' und S2' nach Durchgang durch eine wählbare strahlenfokussierende optische Linse 20 auf eine nicht dargestellte Probe einer Dicke d und in die Ulbricht-Kugel 12. Durch die automatisch bei jedem Messwert nacheinander folgende Abgabe von Probenstrahl 16 und Referenzstrahl 14 wird eine Normierung der Messwerte durchgeführt. Daraus resultiert die Bezeichnung Zweistrahl-Spektrometer.

Die Probe wird im Probenhalter entweder am Transmissionsport 22 oder am Remissionsport 24 der Ulbricht-Kugel 12 befestigt, je nachdem, ob Vorwärts- oder Rückwärts-Streuung gemessen werden soll. Die jeweils gewählte optische Linse 20 regelt die Fokussierung des Lichtspots auf Transmissions- und Remissionsport 22, 24.

Mit einer entsprechenden Anordnung können sodann die makroskopischen optischen Parameter diffuse Remission  $R_d$ , diffuse Transmission  $T_d$  und totale Transmission  $T_t$  gemessen werden. Alternativ kann bei Verwendung eines anderen entsprechend aufge-

bauten Ulbricht-Kugel-Spektrometers - oder einem experimentellen Aufbau mit Ulbricht-Kugel - neben  $R_d$  und  $T_t$  statt der diffusen Transmission  $T_d$  auch die kollimierte Transmission  $T_c$  gemessen werden. Die entsprechenden makroskopischen optischen Parameter sind wie folgt definiert. Beim Auftreffen eines Lichtstrahls bildet sich eine für das jeweilige Medium spezifische Verteilung der Photonen im Bestrahlungsvolumen aus. Ein Teil der Strahlung wird absorbiert. Ein weiterer Teil der Photonen wird im Medium gestreut. Diese Streuung kann unterteilt werden in Rückstreuung als diffuse Remission  $R_d$  und in Vorwärtsstreuung als diffuse Transmission  $T_d$ . Bei geringer Schichtdicke werden auch Photonen ohne vorherige Streuereignisse als kollimierte Transmission  $T_c$  transmittiert. Die Summe aus kollimierter und diffuser Transmission ergibt die totale Transmission  $T_t$  ( $T_d + T_c = T_t$ ). Diese makroskopischen Parameter sind wellenlängen-, material- und schichtdickenabhängig.

Für Materialien, die in Schichtsystemen zum Einsatz gelangen, werden entsprechende makroskopische optische Parameter bestimmt. Aus den makroskopischen optischen Parametern diffuser Remission  $R_d$ , diffuser Transmission  $T_d$  und/oder totaler Transmission  $T_t$  und/oder kollimierter Transmission  $T_c$  - zwei von den Transmissionsparametern müssen bekannt sein ( $T_d + T_c = T_t$ ) - werden sodann durch inverse Monte-Carlo-Simulation die intrinsischen optischen Parameter des Materials bestimmt, und zwar Absorptionskoeffizient  $\mu_a$ , Streukoeffizient  $\mu_s$  und Anisotropiefaktor  $g$ . Dabei werden bei der inversen Monte-Carlo-Simulation zusätzlich Streuphasenfunktion des Materials, Probendicke  $d$  des Materials, Brechungsindex  $n$  des Materials und Messgeometrie berücksichtigt.

Messgeometrie bedeutet bei der Verwendung eines Ulbricht-Kugel-Spektrometers z. B. Probengeometrie, Blendendurchmesser, Kugelpараметer, Strahlendivergenz und Durchmesser des Lichtspots. Mit anderen Worten werden die bei der Messung vorhandenen geometrischen und optischen Verhältnisse in der Simulation berücksichtigt, so dass systematisch Fehler vermieden werden und die Genauigkeit der Simulation erhöht wird. Insbesondere können durch die Berücksichtigung der Messgeometrie z. B. auch seitliche Verluste von Photonen an Probengrenzflächen mit einbezogen werden.

Eine eindeutige Bestimmung der intrinsischen optischen Parameter erfordert die Messung von drei unabhängigen Werten wie  $R_d$ ,  $T_i$  und  $T_c$  bzw.  $T_d$ .

Als Streuphasenfunktion kann die Henyey-Greenstein-Phasenfunktion oder die Reynolds-McCormick-Phasenfunktion verwendet werden. Andere geeignete Streuphasenfunktionen, die für das jeweilige Material typisch sind, können gleichfalls in Betracht gezogen werden.

Die Streuphasenfunktion kann neben einer mathematischen Formel auch aus einer „look up table“ bestehen, also Bestimmung der Streuwahrscheinlichkeit über den Winkel zwischen der Richtung des Photons zum Streuereignis und der Richtung nach dem Streuergebnis. Damit kann für jedes Material eine passende Streuphasenfunktion bestimmt werden. Dabei kann eine Streuphasenfunktion durchaus für mehrere Materialien passen, also nicht eindeutig auf ein Material beschränkt sein. Die Heny Greenstein-Funktion wird beispielsweise gerne für eine Vielzahl biologischer Gewebe verwendet. Wenn  $g$  besonders hoch ist, kann es jedoch von Vorteil sein, die Reynolds-McCormick-Funktion zu verwenden.

Die inverse Monte-Carlo-Simulation ist noch einmal der Fig. 5 zu entnehmen. Prinzipiell arbeitet die inverse Monte-Carlo-Simulation derart, dass von intrinsischen optischen Parameterwerten ausgegangen wird, die sodann auf die gemessenen oder zur Verfügung gestellten makroskopischen optischen Parameter zurückgerechnet werden. Ergibt sich sodann eine Differenz kleiner als eine Fehlergrenze, so werden die zu Grunde gelegten intrinsischen optischen Parameter akzeptiert.

Entsprechend können für in Frage kommenden Materialien die intrinsischen optischen Parameter bestimmt werden.

Soll zum Beispiel die Remission und damit die Farbwirkung eines drei unterschiedlichen Materialschichten 2, 3, 4 umfassenden Systems gemäß der Fig. 2 bestimmt, d. h. vorausgesagt werden, werden die intrinsischen optischen Parameter eines jeden Materials sodann einer Vorwärts-Monte-Carlo-Simulation zugrunde gelegt. Ferner werden bei

dieser Simulation die Messgeometrien sowie für jedes Material jeweils die Streuphasenfunktion der Materialien und der Brechungsindex  $n$  der Materialien berücksichtigt. Ferner gehen die Dicken  $d_1, d_2, d_3$  der Schichten 2, 3, 4 ein. Die Dicke einer jeden Schicht an sich ist dabei konstant.

Aus der Vorwärts-Monte-Carlo-Simulation ergibt sich sodann eine wellenlängenabhängige Remission, aus der durch geeignete Rechenalgorithmen oder Multifaktorenanalyse die Farbwirkung, also Farbwerte nach gewähltem Farbsystem wie CIELAB berechnet werden.

Um eine höhere Genauigkeit zu erzielen, ist erfahrungsgemäß vorgesehen, dass der Absorptionskoeffizient korrigiert wird; denn bei den gemäß Fig. 3 durchgeführten Messungen müssen die Proben eine Dicke aufweisen, die eine Transmission von Licht ermöglicht. Die Absorption kann jedoch umso genauer bestimmt werden, je größer die Dicke einer Schicht ist. Daher werden der Streukoeffizient  $\mu_s$  und der Anisotropiefaktor  $g$ , die mittels inverser Monte-Carlo-Simulation entsprechend der Fig. 4 und 5 berechnet worden sind, sowie die Remission einer optisch dichten Probe der Probendicke  $d_D$  einer weiteren inversen Monte-Carlo-Simulation zugrunde gelegt, aufgrund der nunmehr ein korrigierter Absorptionskoeffizient  $\mu_{ak}$  ermittelt wird. Bei der Simulation werden ebenfalls Streuphasensfunktionen des Materials, Probendicke  $d_D$ , Brechungsindex  $n$  des Materials sowie die Messgeometrie berücksichtigt. Dies ergibt sich aus dem oberen Teil der Fig. 6.

Für ein Mehrschichtsystem wird infolge dessen die im Bereich 26 des Ablaufdiagramms gemäß Fig. 6 prinzipiell dargestellte Berechnung entsprechend der Anzahl der Schichten bzw. unterschiedlichen Materialien durchgeführt, um sodann gemäß zuvor erfolgter Erläuterungen auf der Basis der entsprechenden materialspezifischen intrinsischen optischen Parameter, also korrigierter Absorptionskoeffizient  $\mu_{ak}$ , Streukoeffizient  $\mu_s$  und Anisotropiefaktor  $g$  der Materialien die Remission des Schichtsystems durch Vorwärts-Monte-Carlo-Simulation zu berechnen, wobei von den verschiedenen Materialien deren Streuphasenfunktion, Brechungsindizes  $n_x$  sowie Schichtdicken  $d_x$  und Anzahl  $x$  der Schichten berücksichtigt werden, gegebenenfalls ergänzend die Messgeometrie.

Somit wird die Remission des Gesamtsystems aller Schichten in ihrer geometrischen Abfolge berechnet, so dass erwähntenmaßen die Phasenfunktionen und Brechungsindizes der Materialien der Schichten gewünschter Schichtdicken und Anzahl der Schichten zu berücksichtigen sind. Die Farbwirkung ergibt sich sodann aus der Remission nach z. B. DIN 5033 Farbmessung Teil 1 - 9, Beuth Verlag Berlin, 1979 – 1992.

**Liste der Bezugszeichen**

1	Lichtweg
1'	alternativer Lichtweg
2	erste Materialschicht
3	zweite Materialschicht
4	dritte Materialschicht
10	Probenraum
12	Ulbricht-Kugel
14	Referenzstrahl
16	Probenstrahl
15', 52', 53', 54', 55'	Spiegel
18	Referenzstandard
20	Linse
22	Transmissionsport
24	Remissionsport
26	Bereich der Fig. 6
$\Delta E_{ab}$	Farbabstand nach CIELAB
$\mu_a$	Absorptionskoeffizient
$\mu_{ak}$	korrigierter Absorptionskoeffizient
$\mu_s$	Streukoeffizient
$A_{KM}$	Kubelka-Munk-Absorptionskoeffizient
$d, d_1, d_2, d_3$	Probendicke
$d_D$	Probendicke einer optisch dichten Probe
$g$	Anisotropiefaktor
$n$	Brechungsindex
$R_d$	diffuse Remission
$S_{KM}$	Kubelka-Munk-Streukoeffizient
$T_c$	kollimierte Transmission
$T_d$	diffuse Transmission
$T_t$	totale Transmission

**Ansprüche**

1. Verfahren zur Bestimmung der Farbwirkung von streuenden Materialien wie Werkstoffen oder biologischen Substanzen eines Mehrschichtsystems, insbesondere einer Schichtabfolge in Zähnen oder dentalen Werkstoffen,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass mittels Monte-Carlo-Simulationen auf der Basis jeweiliger intrinsischer optischer Parameter der unterschiedlichen Materialien des Schichtsystems umfassend Streukoeffizient  $\mu_s$ , Anisotropiefaktor  $g$  und korrigierter Absorptionskoeffizient  $\mu_{ak}$  und unter Einbeziehung von jeweils Brechungsindex  $n$ , Dicke  $d$  der jeweiligen Schicht sowie Streuphasenfunktion der einzelnen Materialien die Remission des Mehrschichtsystems berechnet wird.
2. Verfahren nach Anspruch 1,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass die intrinsischen optischen Parameter auf Basis von spektrometrischen Messungen ermittelt werden.
3. Verfahren nach Anspruch 1,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass die intrinsischen optischen Parameter aus einer Datenbank entnommen werden.

4. Verfahren nach zumindest Anspruch 1,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass die intrinsischen optischen Parameter Streukoeffizient  $\mu_s$ , unkorrigierter Absorptionskoeffizient  $\mu_a$  sowie Anisotropiefaktor  $g$  eines Materials auf der Basis der makroskopischen optischen Parameter des Materials in Form von diffuser Remission  $R_d$  sowie diffuser Transmission  $T_d$  und/oder totaler Transmission  $T_t$  und/oder kollimierter Transmission  $T_c$  unter Berücksichtigung der Streuphasenfunktion des Materials, Dicke  $d$  einer bei der Bestimmung der makroskopischen Parameter verwendeten Schicht des Materials und Brechungsindex  $n$  des Materials mittels inverser Monte-Carlo-Simulation berechnet werden.
5. Verfahren nach zumindest einem der vorhergehenden Ansprüche,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass für jedes Material auf der Basis der intrinsischen optischen Parameter Streukoeffizient  $\mu_s$ , unkorrigierter Absorptionskoeffizient  $\mu_a$ , Anisotropiefaktor  $g$  sowie Remission einer aus dem Material bestehenden optisch dichten Schicht einer Dicke  $d_D$  und unter Berücksichtigung zumindest der Dicke  $d_D$ , der Streuphasenfunktion und des Brechungsindex  $n$  des Materials mittels inverser Monte-Carlo-Simulation der korrigierte Absorptionskoeffizient  $\mu_{ak}$  berechnet wird.
6. Verfahren nach zumindest einem der vorhergehenden Ansprüche,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass für das aus unterschiedlichen Materialien bestehende Schichtsystem auf der Basis des korrigierten Absorptionskoeffizienten  $\mu_{ak}$ , des Streukoeffizienten  $\mu_s$  und des Anisotropiefaktors  $g$  eines jeden Materials unter Berücksichtigung von zumindest der Streuphasenfunktion, des Brechungsindex  $n$  und Dicke  $d$  jeder Schicht sowie Schichtreihenfolge mittels Vorwärts-Monte-Carlo-Simulation die Remission des Schichtsystems berechnet wird.

7. Verfahren nach zumindest einem der vorhergehenden Ansprüche,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass bei der Berechnung der intrinsischen optischen Parameter mittels der Monte-Carlo-Simulation bei der experimentellen Bestimmung der makroskopischen optischen Parameter Messparameter und/oder Messgeometrien berücksichtigt werden.
8. Verfahren nach zumindest einem der vorhergehenden Ansprüche,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass aus der Remission die Farbwirkung berechnet wird.
9. Verfahren nach zumindest einem der vorhergehenden Ansprüche,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass die Berechnung der Farbwirkung aus der Remission mittels Algorithmen oder Multifaktorenanalyse erfolgt.
10. Verfahren nach zumindest einem der vorhergehenden Ansprüche,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass die Berechnung der Farbwirkung unter Berücksichtigung geometrischer Erstreckung wie Krümmung des Schichtsystems erfolgt.

Fig. 1

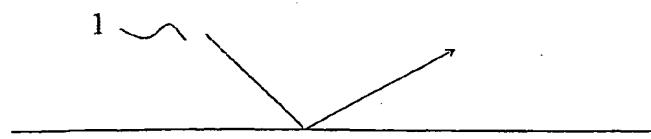
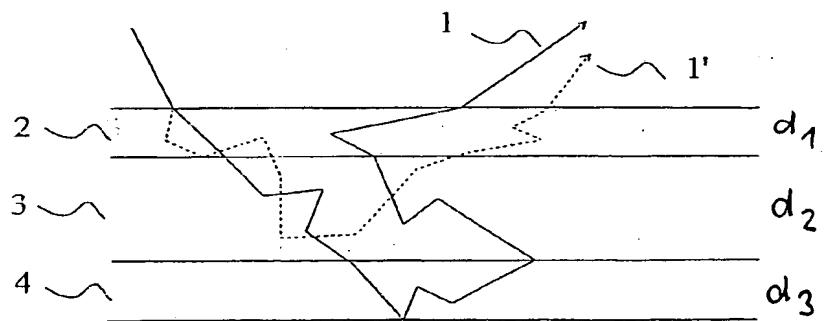


Fig. 2



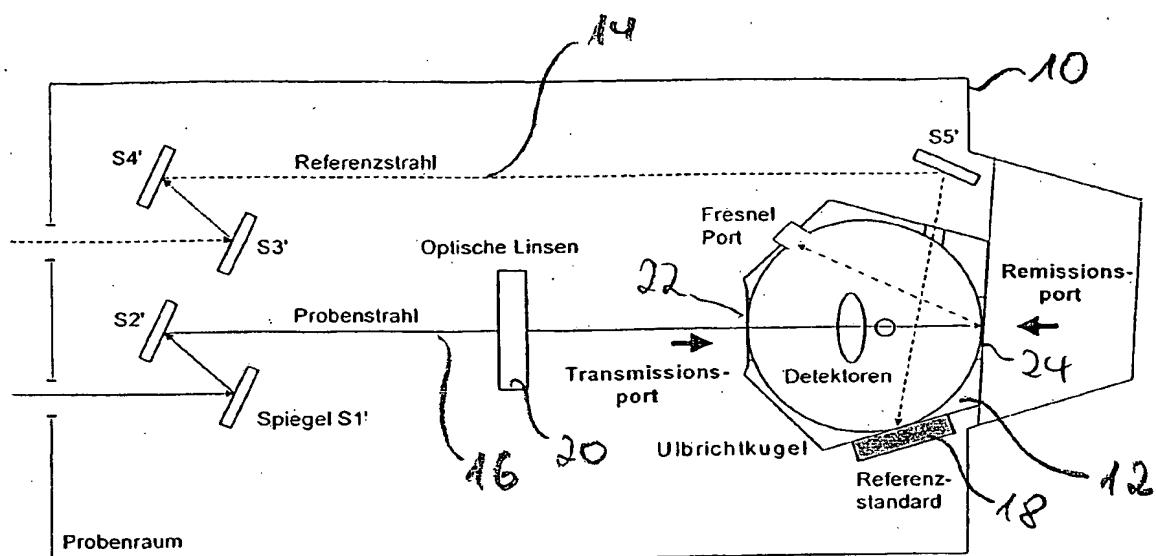


Fig. 3

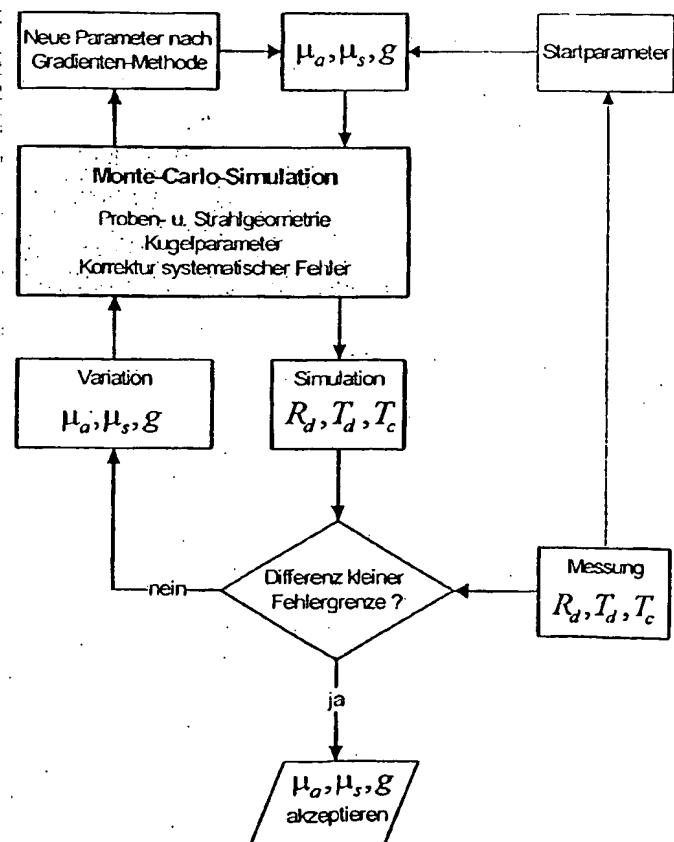


Fig. 5

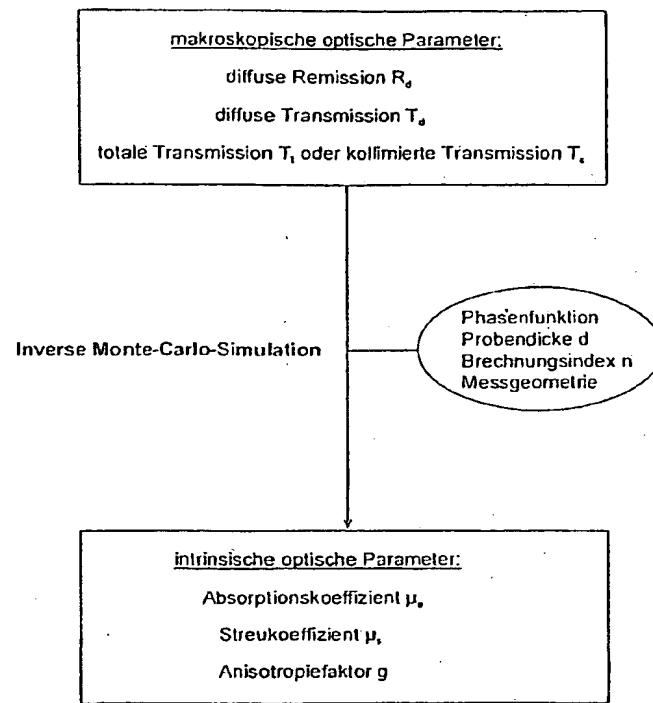
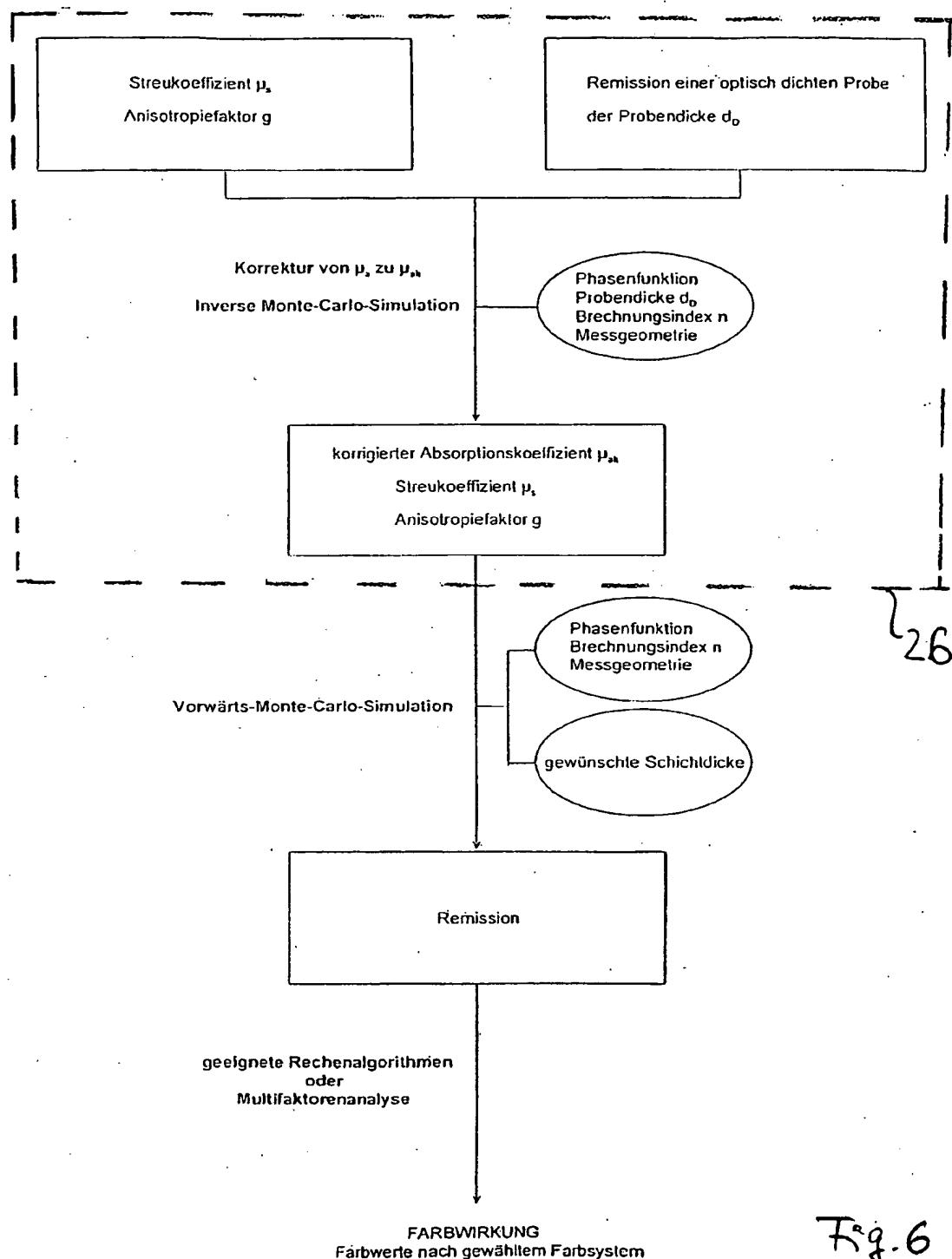


Fig. 4



26

Fig. 6

## INTERNATIONAL-SEARCH REPORT

International Application No  
PCT/EP2005/000319A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER  
IPC 7 G01J3/46

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

## B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)  
IPC 7 G01J

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used)

EPO-Internal, BIOSIS, INSPEC, WPI Data, PAJ

## C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	SHIMADA M ET AL: "Melanin and blood concentration in a human skin model studied by multiple regression analysis: Assessment by Monte Carlo simulation" PHYSICS IN MEDICINE AND BIOLOGY, vol. 46, no. 9, September 2001 (2001-09), pages 2397-2406, XP002325296 ISSN: 0031-9155 page 2398, paragraph 2.2 - page 2399	1-10
X	US 2003/223060-A1-(GRAF JOHN FREDERICK ET AL) 4 December 2003 (2003-12-04) paragraphs '0022!, '0033!, '0035!	1-10
A	US 5 717 605 A (KOMIYA ET AL) 10 February 1998 (1998-02-10) abstract	1-10
	----- -/-	

 Further documents are listed in the continuation of box C. Patent family members are listed in annex.

## • Special categories of cited documents:

- \*A\* document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
- \*E\* earlier document but published on or after the International filing date
- \*L\* document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
- \*O\* document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
- \*P\* document published prior to the International filing date but later than the priority date claimed

- \*T\* later document published after the International filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the Invention
- \*X\* document of particular relevance; the claimed Invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
- \*Y\* document of particular relevance; the claimed Invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art.
- \*&\* document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

Date of mailing of the international search report

27 April 2005

11/05/2005

## Name and mailing address of the ISA

European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2  
NL - 2280 HV Rijswijk  
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl  
Fax: (+31-70) 340-3016

## Authorized officer

Schmidt, C.

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**International Application No  
PCT/EP2005/000319**C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT**

Category	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	DE 196 52 885 A1 (BASF COATINGS AG, 48165 MUENSTER, DE) 25 June 1998 (1998-06-25) column 6, line 10 - column 7, line 60 -----	1-10

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**

Information on patent family members

International Application No

PCT/EP2005/000319

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)		Publication date
US 2003223060	A1 04-12-2003	AU 2003224988	A1 19-12-2003	
		EP 1514083	A1 16-03-2005	
		WO 03102521	A1 11-12-2003	
US 5717605	A 10-02-1998	JP 3454881	B2 06-10-2003	
		JP 7113689	A 02-05-1995	
		JP 3469619	B2 25-11-2003	
		JP 7120324	A 12-05-1995	
		JP 8105799	A 23-04-1996	
DE 19652885	A1 25-06-1998	NONE		

# INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2005/000319

A. Klassifizierung des Anmeldungsgegenstandes  
IPK 7 G01J3/46

Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPK) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPK

## B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierte Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)  
IPK 7 G01J

Recherchierte aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen

Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe)

EPO-Internal, BIOSIS, INSPEC, WPI Data, PAJ

## C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile.	Betr. Anspruch Nr.
X	SHIMADA M ET AL: "Melanin and blood concentration in a human skin model studied by multiple regression analysis: Assessment by Monte Carlo simulation" PHYSICS IN MEDICINE AND BIOLOGY, Bd. 46, Nr. 9, September 2001 (2001-09), Seiten 2397-2406, XP002325296 ISSN: 0031-9155 Seite 2398, Absatz 2.2 – Seite 2399	1-10
X	US 2003/223060 A1 (GRAF JOHN FREDERICK ET AL) 4. Dezember 2003 (2003-12-04) Absätze '0022!, '0033!, '0035!	1-10
A	US 5 717 605 A (KOMIYA ET AL) 10. Februar 1998 (1998-02-10) Zusammenfassung	1-10



Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen



Siehe Anhang Patentfamilie

- \* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen :
- \*A\* Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist
- \*E\* älteres Dokument, das jedoch erst am oder nach dem Internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist
- \*L\* Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchebericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt)
- \*O\* Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benützung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht
- \*P\* Veröffentlichung, die vor dem Internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist
- \*T\* Spätere Veröffentlichung, die nach dem Internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist
- \*X\* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden
- \*Y\* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren anderen Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist
- \*Z\* Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist

Datum des Abschlusses der Internationalen Recherche

27. April 2005

Absendedatum des Internationalen Rechercheberichts

11/05/2005

Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde  
Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentaan 2  
NL - 2280 HV Rijswijk  
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,  
Fax: (+31-70) 340-3016

Bevollmächtigter Bediensteter

Schmidt, C.

## INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen  
PCT/EP2005/000319

## C.(Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
A	DE 196 52 885 A1 (BASF COATINGS AG, 48165 MUENSTER, DE) 25. Juni 1998 (1998-06-25) Spalte 6, Zeile 10 - Spalte 7, Zeile 60 -----	1-10

## INTERNATIONALES RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2005/000319

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie		Datum der Veröffentlichung
US 2003223060	A1 04-12-2003	AU 2003224988	A1 19-12-2003	
		EP 1514083	A1 16-03-2005	
		WO 03102521	A1 11-12-2003	
US 5717605	A 10-02-1998	JP 3454881	B2 06-10-2003	
		JP 7113689	A 02-05-1995	
		JP 3469619	B2 25-11-2003	
		JP 7120324	A 12-05-1995	
		JP 8105799	A 23-04-1996	
DE 19652885	A1 25-06-1998	KEINE		

10585816

**TRANSLATION** PATENT COOPERATION TREATY  
**PCT**

**INTERNATIONAL PRELIMINARY REPORT ON PATENTABILITY**  
(Chapter II of the Patent Cooperation Treaty)

(PCT Article 36 and Rule 70)

Applicant's or agent's file reference <b>44 803</b>	FOR FURTHER ACTION	See Form PCT/IPEA/416
International application No. <b>PCT/EP2005/000319</b>	International filing date (day/month/year) <b>14.01.2005</b>	Priority date (day/month/year) <b>14.01.2004</b>
International Patent Classification (IPC) or national classification and IPC <b>G01J3/46</b>		
Applicant <b>DEGUDENT GMBH</b>		

1.	This report is the international preliminary examination report, established by this International Preliminary Examining Authority under Article 35 and transmitted to the applicant according to Article 36.		
2.	This REPORT consists of a total of <b>4</b> sheets, including this cover sheet.		
3.	This report is also accompanied by ANNEXES, comprising:		
a.	<input checked="" type="checkbox"/> ( <i>sent to the applicant and to the International Bureau</i> ) a total of <b>8</b> sheets, as follows: <input checked="" type="checkbox"/> sheets of the description, claims and/or drawings which have been amended and are the basis for this report and/or sheets containing rectifications authorized by this Authority (see Rule 70.16 and Section 607 of the Administrative Instructions). <input type="checkbox"/> sheets which supersede earlier sheets, but which this Authority considers contain an amendment that goes beyond the disclosure in the international application as filed, as indicated in item 4 of Box No. I and the Supplemental Box.		
b.	<input type="checkbox"/> ( <i>sent to the International Bureau only</i> ) a total of (indicate type and number of electronic carrier(s)) , containing a sequence listing and/or tables related thereto, in computer readable form only, as indicated in the Supplemental Box Relating to Sequence Listing (see Section 802 of the Administrative Instructions).		
4.	This report contains indications relating to the following items:		
	<input checked="" type="checkbox"/> Box No. I Basis of the report <input type="checkbox"/> Box No. II Priority <input type="checkbox"/> Box No. III Non-establishment of opinion with regard to novelty, inventive step and industrial applicability <input type="checkbox"/> Box No. IV Lack of unity of invention <input checked="" type="checkbox"/> Box No. V Reasoned statement under Article 35(2) with regard to novelty, inventive step or industrial applicability; citations and explanations supporting such statement <input type="checkbox"/> Box No. VI Certain documents cited <input type="checkbox"/> Box No. VII Certain defects in the international application <input type="checkbox"/> Box No. VIII Certain observations on the international application		

Date of submission of the demand	Date of completion of this report
Name and mailing address of the IPEA/EP	Authorized officer
Facsimile No.	Telephone No.

## INTERNATIONAL PRELIMINARY REPORT ON PATENTABILITY

International application No.  
PCT/EP2005/000319

## Box No. I Basis of the report

1. With regard to the language, this report is based on the international application in the language in which it was filed, unless otherwise indicated under this item.

This report is based on translations from the original language into the following language \_\_\_\_\_ which is the language of a translation furnished for the purposes of:

international search (Rule 12.3 and 23.1(b))  
 publication of the international application (Rule 12.4)  
 international preliminary examination (Rule 55.2 and/or 55.3)

2. With regard to the elements of the international application, this report is based on (replacement sheets which have been furnished to the receiving Office in response to an invitation under Article 14 are referred to in this report as "originally filed" and are not annexed to this report):

the international application as originally filed/furnished  
 the description:

pages 2, 6-14 as originally filed/furnished  
 pages\* 1, 3, 3a, 4, 5 received by this Authority on 15.11.2005 with letter of 11.11.2005  
 pages\* \_\_\_\_\_ received by this Authority on \_\_\_\_\_

the claims:

nos. 10 as originally filed/furnished  
 nos.\* \_\_\_\_\_ as amended (together with any statement) under Article 19  
 nos.\* 1-9 received by this Authority on 15.11.2005 with letter of 11.11.2005  
 nos.\* \_\_\_\_\_ received by this Authority on \_\_\_\_\_

the drawings:

sheets 1/4-4/4 as originally filed/furnished  
 sheets\* \_\_\_\_\_ received by this Authority on \_\_\_\_\_  
 sheets\* \_\_\_\_\_ received by this Authority on \_\_\_\_\_

a sequence listing and/or any related table(s) – see Supplemental Box Relating to Sequence Listing.

3.  The amendments have resulted in the cancellation of:

the description, pages \_\_\_\_\_  
 the claims, nos. \_\_\_\_\_  
 the drawings, sheets/figs \_\_\_\_\_  
 the sequence listing (specify): \_\_\_\_\_  
 any table(s) related to sequence listing (specify): \_\_\_\_\_

4.  This report has been established as if (some of) the amendments annexed to this report and listed below had not been made, since they have been considered to go beyond the disclosure as filed, as indicated in the Supplemental Box (Rule 70.2(c)).

the description, pages \_\_\_\_\_  
 the claims, nos. \_\_\_\_\_  
 the drawings, sheets/figs \_\_\_\_\_  
 the sequence listing (specify): \_\_\_\_\_  
 any table(s) related to sequence listing (specify): \_\_\_\_\_

\* If item 4 applies, some or all of those sheets may be marked "superseded."

## INTERNATIONAL PRELIMINARY REPORT ON PATENTABILITY

International application No.  
PCT/EP2005/000319Box No. V **Reasoned statement under Article 35(2) with regard to novelty, inventive step or industrial applicability; citations and explanations supporting such statement**

## 1. Statement

Novelty (N)	Claims	1-9	YES
	Claims		NO
Inventive step (IS)	Claims	1-9	YES
	Claims		NO
Industrial applicability (IA)	Claims	1-9	YES
	Claims		NO

## 2. Citations and explanations (Rule 70.7)

Reference is made to the following documents:

D1: SHIMADA M ET AL: "Melanin and blood concentration in a human skin model studied by multiple regression analysis: Assessment by Monte Carlo simulation" PHYSICS IN MEDICINE AND BIOLOGY, Vol. 46, No. 9, September 2001 (2001-09), pages 2397-2406, XP002325296 ISSN: 0031-9155

D2: US 2003/223060 A1 (GRAF JOHN FREDERICK ET AL) 4 December 2003 (2003-12-04)

D3: US-A-5 717 605 (KOMIYA ET AL) 10 February 1998 (1998-02-10)

D4: DE 196 52 885 A1 (BASF COATINGS AG, 48165 MUENSTER, DE) 25 June 1998 (1998-06-25)

Document D1 is considered the prior art closest to the subject matter of claim 1 and discloses a method for determining the colour effect of dispersive materials, according to the preamble of claim 1.

The subject matter of claim 1 thus differs from

## INTERNATIONAL PRELIMINARY REPORT ON PATENTABILITY

International application No.  
PCT/EP2005/000319Box No. V Reasoned statement under Article 35(2) with regard to novelty, inventive step or industrial applicability; citations and explanations supporting such statement

the known method in that a corrected absorption co-efficient is calculated by an additional inverse Monte Carlo simulation based on the remission of the particular material of an optically dense layer.

The subject matter of claim 1 is thus novel (PCT Article 33(2)).

The present invention can therefore be considered to address the problem of achieving a sufficiently precise determination of the colour effect of the multilayer system. This is of particular significance in the dental industry, since even minimal differences in colour between dentures and natural teeth are discernible.

Such a solution is not suggested by the cited prior art. The solution to the problem of interest as proposed in claim 1 of the present application therefore involves an inventive step (PCT Article 33(3)).

Claims 2 to 9 are dependent on claim 1 and therefore likewise meet the PCT requirements for novelty and inventive step.

10585816

**VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM  
GEBIET DES PATENTWESENS**

**PCT**

**INTERNATIONALER VORLÄUFIGER BERICHT ÜBER DIE  
PATENTIERBARKEIT**

(Kapitel II des Vertrags über die internationale Zusammenarbeit auf dem Gebiet des Patentwesens)

REC'D 06 APR 2006  
WIPO PCT

Aktenzeichen des Anmelders oder Anwalts 44 803	WEITERES VORGEHEN	siehe Formblatt PCT/PEA/416
Internationales Aktenzeichen PCT/EP2005/000319	Internationales Anmeldedatum (Tag/Monat/Jahr) 14.01.2005	Prioritätsdatum (Tag/Monat/Jahr) 14.01.2004
Internationale Patentklassifikation (IPC) oder nationale Klassifikation und IPC INV. G01J3/46		
Anmelder DEGUDENT GMBH et al.		

1. Bei diesem Bericht handelt es sich um den internationalen vorläufigen Prüfungsbericht, der von der mit der internationalen vorläufigen Prüfung beauftragten Behörde nach Artikel 35 erstellt wurde und dem Anmelder gemäß Artikel 36 übermittelt wird.
2. Dieser BERICHT umfaßt insgesamt 5 Blätter einschließlich dieses Deckblatts.
3. Außerdem liegen dem Bericht ANLAGEN bei; diese umfassen
  - a.  (an den Anmelder und das Internationale Büro gesandt) insgesamt 8 Blätter; dabei handelt es sich um
    - Blätter mit der Beschreibung, Ansprüchen und/oder Zeichnungen, die geändert wurden und diesem Bericht zugrunde liegen, und/oder Blätter mit Bemerkungen, denen die Behörde zugestimmt hat (siehe Regel 70.16 und Abschnitt 607 der Verwaltungsvorschriften).
    - Blätter, die frühere Blätter ersetzen, die aber aus den in Feld Nr. 1, Punkt 4 und im Zusatzfeld angegebenen Gründen nach Auffassung der Behörde eine Änderung enthalten, die über den Offenbarungsgehalt der internationalen Anmeldung in der ursprünglich eingereichten Fassung hinausgeht.
  - b.  (nur an das Internationale Büro gesandt) insgesamt (bitte Art und Anzahl der/des elektronischen Datenträger(s) angeben), der/die ein Sequenzprotokoll und/oder die dazugehörigen Tabellen enthält/enthalten, nur in elektronischer Form, wie im Zusatzfeld betreffend das Sequenzprotokoll angegeben (siehe Abschnitt 802 der Verwaltungsvorschriften).

4. Dieser Bericht enthält Angaben zu folgenden Punkten:

- Feld Nr. I Grundlage des Berichts
- Feld Nr. II Priorität
- Feld Nr. III Keine Erstellung eines Gutachtens über Neuheit, erforderliche Tätigkeit und gewerbliche Anwendbarkeit
- Feld Nr. IV Mangelnde Einheitlichkeit der Erfindung
- Feld Nr. V Begründete Feststellung nach Artikel 35(2) hinsichtlich der Neuheit, der erforderlichen Tätigkeit und der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser Feststellung
- Feld Nr. VI Bestimmte angeführte Unterlagen
- Feld Nr. VII Bestimmte Mängel der internationalen Anmeldung
- Feld Nr. VIII Bestimmte Bemerkungen zur internationalen Anmeldung

Datum der Einreichung des Antrags 10.08.2005	Datum der Fertigstellung dieses Berichts 05.04.2006
Name und Postanschrift der mit der internationalen vorläufigen Prüfung beauftragten Behörde Europäisches Patentamt D-80298 München Tel. +49 89 2399 - 0 Tx: 523656 epmu d Fax: +49 89 2399 - 4465	Bevollmächtigter Bediensteter Schmidt, C. Tel. +49 89 2399-2254



# **INTERNATIONALER VORLÄUFIGER BERICHT ÜBER DIE PATENTIERBARKEIT**

Internationales Aktenzeichen  
PCT/EP2005/000319

## **Feld Nr. I Grundlage des Berichts**

1. Hinsichtlich der **Sprache** beruht der Bericht auf der internationalen Anmeldung in der Sprache, in der sie eingereicht wurde, sofern unter diesem Punkt nichts anderes angegeben ist.

Der Bericht beruht auf einer Übersetzung aus der Originalsprache in die folgende Sprache, bei der es sich um die Sprache der Übersetzung handelt, die für folgenden Zweck eingereicht worden ist:

internationale Recherche (nach Regeln 12.3 und 23.1 b))  
 Veröffentlichung der Internationalen Anmeldung (nach Regel 12.4)  
 internationale vorläufige Prüfung (nach Regeln 55.2 und/oder 55.3)

2. Hinsichtlich der **Bestandteile\*** der internationalen Anmeldung beruht der Bericht auf (*Ersatzblätter, die dem Anmeldeamt auf eine Auflorderung nach Artikel 14 hin vorgelegt wurden, gelten im Rahmen dieses Berichts als "ursprünglich eingereicht" und sind ihm nicht beigefügt*):

### **Beschreibung, Seiten**

2, 6-14 in der ursprünglich eingereichten Fassung  
1, 3, 3a, 4, 5 eingegangen am 15.11.2005 mit Schreiben vom 11.11.2005

### **Ansprüche, Nr.**

10 in der ursprünglich eingereichten Fassung  
1-9 eingegangen am 15.11.2005 mit Schreiben vom 11.11.2005

## Zeichnungen, Blätter

1/4-4/4 In der ursprünglich eingereichten Fassung

einem Sequenzprotokoll und/oder etwaigen dazugehörigen Tabellen - siehe Zusatzfeld betreffend das Sequenzprotokoll

3.  Aufgrund der Änderungen sind folgende Unterlagen fortgefallen:

- Beschreibung: Seite
- Ansprüche: Nr.
- Zeichnungen: Blatt/Abb.
- Sequenzprotokoll (*genaue Angaben*):
- etwaige zum Sequenzprotokoll gehörende Tabellen (*genaue Angaben*):

4.  Dieser Bericht ist ohne Berücksichtigung (von einigen) der diesem Bericht beigefügten und nachstehend aufgelisteten Änderungen erstellt worden, da diese aus den im Zusatzfeld angegebenen Gründen nach Auffassung der Behörde über den Offenbarungsgehalt in der ursprünglich eingereichten Fassung hinausgehen (Regel 70.2 c)).

- Beschreibung: Seite
- Ansprüche: Nr.
- Zeichnungen: Blatt/Abb.
- Sequenzprotokoll (*genaue Angaben*):
- etwaige zum Sequenzprotokoll gehörende Tabellen (*genaue Angaben*):

\* Wenn Punkt 4 zutrifft, können einige oder alle dieser Blätter mit der Bemerkung "ersetzt" versehen werden.

**INTERNATIONALER VORLÄUFIGER BERICHT  
ÜBER DIE PATENTIERBARKEIT**

Internationales Aktenzeichen  
PCT/EP2005/000319

**Feld Nr. V Begründete Feststellung nach Artikel 35 (2) hinsichtlich der Neuheit, der erfinderischen Tätigkeit und der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser Feststellung**

1. Feststellung  
Neuheit (N) Ja: Ansprüche 1-9  
Nein: Ansprüche

Erfinderische Tätigkeit (IS) Ja: Ansprüche 1-9  
Nein: Ansprüche

Gewerbliche Anwendbarkeit (IA) Ja: Ansprüche: 1-9  
Nein: Ansprüche:

2. Unterlagen und Erklärungen (Regel 70.7):

**siehe Beiblatt**

**Zu Punkt V**

**Begründete Feststellung hinsichtlich der Neuheit, der erfinderischen Tätigkeit und  
der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser  
Feststellung**

Es wird auf die folgenden Dokumente verwiesen:

D1: SHIMADA M ET AL: "Melanin and blood concentration in a human skin model studied by multiple regression analysis: Assessment by Monte Carlo simulation" PHYSICS IN MEDICINE AND BIOLOGY, Bd. 46, Nr. 9, September 2001 (2001-09), Seiten 2397-2406, XP002325296 ISSN: 0031-9155

D2: US 2003/223060 A1 (GRAF JOHN FREDERICK ET AL) 4. Dezember 2003 (2003-12-04)

D3: US-A-5 717 605 (KOMIYA ET AL) 10. Februar 1998 (1998-02-10)

D4: DE 196 52 885 A1 (BASF COATINGS AG, 48165 MUENSTER, DE) 25. Juni 1998 (1998-06-25)

---

Das Dokument D1 wird als nächstliegender Stand der Technik gegenüber dem Gegenstand des Anspruchs 1 angesehen. Es offenbart ein Verfahren zur Bestimmung der Farbwirkung von streuenden Materialien nach dem Oberbegriff des Anspruchs 1.

Der Gegenstand des Anspruchs 1 unterscheidet sich daher von dem bekannten Verfahren dadurch, dass ein korrigierter Absorptionskoeffizient, unter Zugrundelegung der Remission des jeweiligen Materials einer optisch dichten Schicht, durch eine zusätzliche inverse Monte-Carlo-Simulation berechnet wird.

Der Gegenstand des Anspruchs 1 ist somit neu (Artikel 33(2) PCT).

Die mit der vorliegenden Erfindung zu lösende Aufgabe kann somit darin gesehen werden, dass eine hinreichend genaue Bestimmung der Farbwirkung des Mehrschichtsystems erreicht wird. Dies ist insbesondere auf dem Gebiet der Zahntechnik von Bedeutung, da

**INTERNATIONALER VORLÄUFIGER  
BERICHT ZUR PATENTIERBARKEIT  
(BEIBLATT)**

Internationales Aktenzeichen  
**PCT/EP2005/000319**

auch minimale Farbabweichungen zwischen Zahnersatz und natürlichen Zähnen  
wahrnehmbar sind.

Eine derartige Lösung wird aus dem zitierten Stand der Technik nicht nahegelegt.  
Die in Anspruch 1 der vorliegenden Anmeldung für diese Aufgabe vorgeschlagene Lösung  
beruht somit auf einer erforderischen Tätigkeit (Artikel 33(3) PCT).

Die Ansprüche 2 bis 9 sind vom Anspruch 1 abhängig und erfüllen damit ebenfalls die  
Erfordernisse des PCT in bezug auf Neuheit und erforderliche Tätigkeit.

## Beschreibung

### Verfahren zur Bestimmung der Farbwahrnehmung bei Mehrschichtsystemen

Die Erfindung bezieht sich auf Verfahren zur Bestimmung der Farbwirkung von streuenden Materialien, wie Werkstoffen oder biologischen Substanzen eines Mehrschichtsystems, insbesondere einer Schichtabfolge in Zähnen oder dentalen Werkstoffen, wobei die Remission des Mehrschichtsystems durch Vorwärts-Monte-Carlo-Simulation von durch inverse Monte-Carlo-Simulation berechneten intrinsischen optischen Parametern Streukoeffizient  $\mu_s$ , Anisotropiefaktor  $g$  und Absorptionskoeffizient der unterschiedlichen Materialien unter Berücksichtigung von Brechungsindex  $n$ , Dicke  $d$  der jeweiligen Schicht der Materialien sowie Streuphasenfunktion der einzelnen Materialien berechnet und aus der Remission die Farbwirkung ermittelt wird.

Ein Ziel der Bestimmung der Farbwahrnehmung ist eine Anpassung oder ein Abgleich der Farbwirkung von neuen Mehrschichtsystemen an vorhandene Mehrschichtsysteme, beispielsweise als Maßnahme der Qualitätssicherung oder bei der Entwicklung und Beurteilung neuer Materialien und deren Kombinationen. Dies gilt für Mehrschichtsysteme im Bereich von kosmetischen oder ästhetischen medizinischen Anwendungen, wie z. B. für Zahnersatz, bis hin zu technischen Gebieten, wie z. B. für Autolacke oder Kunststoffe. Die Farbwirkung eines Materialsystems ist abhängig von der Schichtdicke und der Rückstreuung (Remission) des Lichts und kann gemäß DIN 5033 nach dem Gleichheits-, Dreibereichs- oder Spektralverfahren nach unterschiedlichen Farbsystemen, wie z. B. CIELAB oder CIELUV, ermittelt werden. Genutzt werden beispielsweise Messgeräte wie Farbspektrometer oder Colorimeter sowie eine visuelle Abmusterung beispielsweise mittels spezieller Farbskalen, wie diese z. B. für den Bereich Zahnmedizin in der DE-A-196 46 923, der DE-A-101 21 553 oder der DE-A-100 23 840 beschrieben werden.

Aufgrund des bei Mehrschichtsystemen durchzuführenden technischen Herstellungsprozesses sowie der Kombination von Einzelschichten kann die Farbwirkung nicht direkt verglichen, sondern erst im nach hinein, also nach Fertigstellung bestimmt und beurteilt werden, wenn keine Farbkorrektur mehr möglich ist.

troffen. Damit entstehen systematische Fehler, die sich in sichtbaren Farbunterschieden zwischen Simulationsergebnis und Wirklichkeit bemerkbar machen können. Der größte Nachteil der Kubelka-Munk-Theorie besteht jedoch darin, dass nur Vorgänge der Oberflächenreflexion berücksichtigt werden können. Dies wird in Fig. 1 beispielhaft am Lichtweg eines Photons 1 nach Reflexion des Lichts an der Oberfläche einer Materialschicht 2 vorgegebener Dicke dargestellt ist.

Mit der Kubelka-Munk-Gleichung können bei Mehrschichtsystemen, bei denen nicht molekulare, sondern strukturelle Streugeometrien vorliegen, die tatsächlich vorliegenden Verhältnisse nicht mehr korrekt wiedergegeben werden. Denn hierbei kommt es durch den Schichtaufbau und die Strukturbesonderheiten zu einer Lichtausbreitung mit internen Vielfachstreuereignissen im Material oder Werkstoff. Die Remission und damit die Farbwirkung ergeben sich aus einem sehr komplexen Zusammenspiel der optischen Eigenschaften der unterschiedlichen Inhaltsstoffe und Komponenten der Schichten aufgrund der Lichtausbreitung durch Streuung, Absorption und Brechung an Grenzschichten. Fig. 2 zeigt beispielhaft den Lichtweg eines Photons 1 sowie einen alternativen Lichtweg 1' nach multiplen Streuereignissen innerhalb mehrerer hintereinander liegender Materialschichten 2, 3, 4 unterschiedlicher Dicke und Art. Bei Anwendung der Kubelka-Munk-Gleichung sind daher für Mehrschichtsysteme mit Strukturstreuung wesentliche Abstriche bei der Genauigkeit der Vorhersage der Remission und somit der Farbwirkung hinzunehmen, die sich als visuell wahrnehmbare Unterschiede bemerkbar machen. Zur Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit der Remission und damit der Farbwirkung ist daher die Entwicklung eines Verfahrens erforderlich, das diese strukturell bedingte Vielfachstreuung korrekt und genau berücksichtigen kann.

Ein Verfahren der eingangs genannten Art ist der Literaturstelle GB.Z.: PHYSICS IN MEDICINE AND BIOLOGY, Band.46, Nr. 9. September 2001, S. 2397 – 2406, Shimada M. et al. „Melanin and blood concentration in a human skin model studied by multiple regression analysis: assessment by Monte Carlo simulation“ zu entnehmen.

Die Farbwirkung eines Mehrschichtsystems mittels Monte-Carlo-Simulationen wird auch nach der US-A-2003/0223060 bestimmt. Dabei interessiert vorrangig die Farbwirkung von Mehrschichtsystemen bei Farben, Textilien oder in der kosmetischen Industrie.

3 a

Der vorliegenden Erfindung liegt die Aufgabe zu Grunde, dass die Farbwahrnehmung für Mehrschichtsysteme aus Kombinationen verschiedener streuender Werkstoffe oder biologischer Materialien aus zusammengesetzten, unterschiedlichen Schichten mit verschiedenen optischen Eigenschaften für variierende Schichtdicken genauer als bisher berechnet und damit vorhergesagt werden kann, ohne jeweils immer wieder Proben, bestehend aus den kombinierten interessierenden Schichtdicken, herstellen und deren

Farbwirkung, beispielsweise in konventionellen Farbspektralphotometern, messen zu müssen.

Insbesondere soll die Farbwahrnehmung für Mehrschichtsysteme im dentalen Bereich berechnet bzw. vorhergesagt werden, wobei Schichtabfolgen in Zähnen wie Schmelz und Dentin in beliebiger Schichtstärke und dentale Werkstoffe wie Komposita und Keramiken von besonderem Interesse sind.

Zur Lösung der Aufgabe sieht die Erfindung im Wesentlichen vor, dass zunächst die intrinsischen Parameter Streukoeffizient  $\mu_s$ , Anisotropiefaktor  $g$  und Absorptionskoeffizient des jeweiligen Materials unter Zugrundelegung einer Transmission von Licht ermöglichen Schichtdicke des Materials berechnet werden und sodann durch inverse Monte-Carlo-Simulation ein korrigierter Absorptionskoeffizient  $\mu_{ak}$  unter Zugrundelegung der Remission des jeweiligen Materials einer optisch dichten Schicht einer Dicke  $d_D$  berechnet wird, wobei der korrigierte Absorptionskoeffizient  $\mu_{ak}$  als der Absorptionskoeffizient der Berechnung der Remission und der Farbwirkung des Mehrschichtsystems zu Grunde gelegt wird.

Dabei können die intrinsischen optischen Parameter auf Basis von spektrometrischen Messungen ermittelt oder aus einer Datenbank entnommen werden.

Erfnungsgemäß wird ein Verfahren vorgeschlagen, mit dem die visuelle Wahrnehmung der Farbe von Mehrschichtsystemen oder die Ergebnisse deren messtechnischer Erfassung, wie beispielsweise durch Farbspektrometer, ausreichend genau bestimmt bzw. vorhergesagt werden können. Es hat sich überraschenderweise gezeigt, dass bei Vorliegen von strukturellen Streugeometrien in Mehrschichtsystemen mit Simulationsrechnungen nach dem Prinzip der Monte-Carlo-Simulation als dreidimensionalem Lösungsansatz der Strahlungstransportgleichung und eines anschließenden speziellen Korrekturverfahrens eine korrekte und wesentlich genauere Bestimmung der Farbwahrnehmung als bisher möglich ist.

Als Ausgangsdaten für die erfundungsgemäße Lösung dienen die optischen Eigenschaften der jeweiligen im Mehrschichtsystem enthaltenen Werkstoffe oder biologischen Materialien in Form der intrinsischen optischen Parameter Absorptionskoeffizient  $\mu_a$ , Streukoeffizient  $\mu_s$  und Anisotropiefaktor  $g$ .

Zur Ermittlung der intrinsischen optischen Parameter - auch bezeichnet als mikroskopische Parameter -, die unabhängig von der Materialdicke sind, können Verfahren zur Anwendung gelangen, die aus der Gewebeoptik für Dosimetrieberechnungen bei medizinischen Lasertherapien bekannt sind. So kann mit Hilfe einer inversen Monte-Carlo-Simulation aus den in einem Ulbricht-Kugel-Spektrometer an Proben mit einer zuvor ermittelten geeigneten Probendicke  $d$  gemessenen makroskopischen optischen Parametern wie der diffusen Remission  $R_d$ , der totalen Transmission  $T_t$  sowie der diffusen Transmission  $T_d$  oder der kollimierten Transmission  $T_c$  eine Berechnung erfolgen.

Insbesondere ist vorgesehen, dass die intrinsischen optischen Parameter Streukoeffizient  $\mu_s$ , (unkorrigierter) Absorptionskoeffizient  $\mu_a$  sowie Anisotropiefaktor  $g$  eines Materials auf der Basis der makroskopischen optischen Parameter des Materials in Form von insbesondere diffuser Remission  $R_d$ , diffuser Transmission  $T_d$  und/oder totaler Transmission  $T_t$  und/oder kollimierter Transmission  $T_c$  unter Berücksichtigung der Streuphasenfunktion des Materials, Dicke  $d$  einer bei der Bestimmung der makroskopischen Parameter verwendeten Schicht des Materials und Brechungsindex  $n$  des Materials mittels inverser Monte-Carlo-Simulation berechnet werden.

Sodann wird für jedes Material auf der Basis der beiden intrinsischen optischen Parameter Streukoeffizient  $\mu_s$  und Anisotropiefaktor  $g$  sowie der Remission einer aus dem Material bestehenden optisch dichten Schicht einer Dicke  $d_D$  und unter Berücksichtigung zumindest der Dicke  $d_D$ , der Streuphasenfunktion und des Brechungsindex  $n$  des Materials mittels inverser Monte-Carlo-Simulation der korrigierte Absorptionskoeffizient  $\mu_{ak}$  berechnet. Der Streukoeffizient  $\mu_s$  sowie der Anisotropiefaktor  $g$  sind bereits aus zuvor erfolgter Berechnung bekannt.

Mit anderen Worten erfolgt erfahrungsgemäß eine Korrektur des berechneten Absorptionskoeffizienten  $\mu_a$  mit Hilfe der Remissionswerte einer optisch dichteren Probe der Probendicke  $d_D$  des zu untersuchenden Materials zusammen mit den ermittelten Werten von  $\mu_s$  und  $g$  in einer erneuten inversen Monte-Carlo-Simulation zum korrigierten Absorptionskoeffizient  $\mu_{ak}$ . Durch diesen Schritt wird die Genauigkeit der Berechnung der Farbwirkung wesentlich erhöht.

**Patentansprüche**

1. Verfahren zur Bestimmung der Farbwirkung von streuenden Materialien, wie Werkstoffen oder biologischen Substanzen eines Mehrschichtsystems, insbesondere einer Schichtabfolge in Zähnen oder dentalen Werkstoffen, wobei die Remission des Mehrschichtsystems durch Vorwärts-Monte-Carlo-Simulation von durch inverse Monte-Carlo-Simulation berechneten intrinsischen optischen Parametern Streukoeffizient  $\mu_s$ , Anisotropiefaktor  $g$  und Absorptionskoeffizient der unterschiedlichen Materialien unter Berücksichtigung von Brechungsindex  $n$ , Dicke  $d$  der jeweiligen Schicht der Materialien sowie Streuphasenfunktion der einzelnen Materialien berechnet und aus der Remission die Farbwirkung ermittelt wird,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass zunächst die intrinsischen Parameter Streukoeffizient  $\mu_s$ , Anisotropiefaktor  $g$  und Absorptionskoeffizient des jeweiligen Materials unter Zugrundelegung einer Transmission von Licht ermöglichen Schichtdicke des Materials berechnet werden und sodann durch inverse Monte-Carlo-Simulation ein korrigierter Absorptionskoeffizient  $\mu_{ak}$  unter Zugrundelegung der Remission des jeweiligen Materials einer optisch dichten Schicht einer Dicke  $d_D$  berechnet wird, wobei der korrigierte Absorptionskoeffizient  $\mu_{ak}$  als der Absorptionskoeffizient der Berechnung der Remission und der Farbwirkung des Mehrschichtsystems zu Grunde gelegt wird.
2. Verfahren nach Anspruch 1,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass die intrinsischen optischen Parameter auf Basis von spektrometrischen Messungen ermittelt werden.
3. Verfahren nach Anspruch 1,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass die intrinsischen optischen Parameter aus einer Datenbank entnommen werden.

4. Verfahren nach zumindest Anspruch 1,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass die intrinsischen optischen Parameter Streukoeffizient  $\mu_s$ , unkorrigierter Absorptionskoeffizient  $\mu_a$  sowie Anisotropiefaktor  $g$  eines Materials auf der Basis der makroskopischen optischen Parameter des Materials in Form von diffuser Remission  $R_d$  sowie diffuser Transmission  $T_d$  und/oder totaler Transmission  $T_t$  und/oder kollimierter Transmission  $T_c$  unter Berücksichtigung der Streuphasenfunktion des Materials, Dicke  $d$  einer bei der Bestimmung der makroskopischen Parameter verwendeten Schicht des Materials und Brechungsindex  $n$  des Materials mittels inverser Monte-Carlo-Simulation berechnet werden.
5. Verfahren nach zumindest Anspruch 1,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass für das aus unterschiedlichen Materialien bestehende Schichtsystem auf der Basis des korrigierten Absorptionskoeffizienten  $\mu_{ak}$ , des Streukoeffizienten  $\mu_s$  und des Anisotropiefaktors  $g$  eines jeden Materials unter Berücksichtigung von zumindest der Streuphasenfunktion, des Brechungsindex  $n$  und Dicke  $d$  jeder Schicht sowie Schichtreihenfolge mittels Vorwärts-Monte-Carlo-Simulation die Remission des Schichtsystems berechnet wird.
6. Verfahren nach zumindest einem der vorhergehenden Ansprüche,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass bei der Berechnung der intrinsischen optischen Parameter mittels der inversen Monte-Carlo-Simulation Messparameter und/oder Messgeometrien aus der experimentellen Bestimmung der makroskopischen optischen Parameter berücksichtigt werden.
7. Verfahren nach Anspruch 1,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass die Berechnung der Farbwirkung aus der Remission mittels Algorithmen oder Multifaktorenanalyse erfolgt.

8. Verfahren nach Anspruch 1,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass die Berechnung der Farbwirkung unter Berücksichtigung geometrischer  
Erstreckung wie Krümmung des Schichtsystems erfolgt.
  
9. Verfahren nach Anspruch 6,  
dadurch gekennzeichnet,  
dass bei Verwendung eines Ulbricht-Kugel-Spektrometers als Messgeometrie  
Probengeometrie, Blendendurchmesser, Kugelparameter, Strahlendivergenz oder  
Durchmesser eines Lichtspots zu Grunde gelegt wird.

10585816

**VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM  
GEBIET DES PATENTWESENS**

Absender: INTERNATIONALE RECHERCHENBEHÖRDE

REC'D 09 MAY 2005

WIPO

PCT

PCT

An:

siehe Formular PCT/ISA/220

**SCHRIFTLICHER BESCHEID DER  
INTERNATIONALEN  
RECHERCHENBEHÖRDE**  
(Regel 43bis.1 PCT)

Absendedatum  
(Tag/Monat/Jahr) siehe Formular PCT/ISA/210 (Blatt 2)

Aktenzeichen des Anmelders oder Anwalts  
siehe Formular PCT/ISA/220

**WEITERES VORGEHEN**  
siehe Punkt 2 unten

Internationales Aktenzeichen  
PCT/EP2005/000319

Internationales Anmeldedatum (Tag/Monat/Jahr)  
14.01.2005

Prioritätsdatum (Tag/Monat/Jahr)  
14.01.2004

Internationale Patentklassifikation (IPK) oder nationale Klassifikation und IPK  
G01J3/46

Anmelder  
DEGUDENT GMBH

**1. Dieser Bescheid enthält Angaben zu folgenden Punkten:**

- Feld Nr. I Grundlage des Bescheids
- Feld Nr. II Priorität
- Feld Nr. III Keine Erstellung eines Gutachtens über Neuheit, erfinderische Tätigkeit und gewerbliche Anwendbarkeit
- Feld Nr. IV Mangelnde Einheitlichkeit der Erfindung
- Feld Nr. V Begründete Feststellung nach Regel 43bis.1(a)(i) hinsichtlich der Neuheit, der erfinderischen Tätigkeit und der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser Feststellung
- Feld Nr. VI Bestimmte angeführte Unterlagen
- Feld Nr. VII Bestimmte Mängel der internationalen Anmeldung
- Feld Nr. VIII Bestimmte Bemerkungen zur internationalen Anmeldung

**2. WEITERES VORGEHEN**

Wird ein Antrag auf internationale vorläufige Prüfung gestellt, so gilt dieser Bescheid als schriftlicher Bescheid der mit der Internationalen vorläufigen Prüfung beauftragten Behörde ("IPEA"); dies trifft nicht zu, wenn der Anmelder eine andere Behörde als diese als IPEA wählt und die gewählte IPEA dem Internationalen Büro nach Regel 66.1bis b) mitgeteilt hat, daß schriftliche Bescheide dieser Internationalen Recherchenbehörde nicht anerkannt werden.

Wenn dieser Bescheid wie oben vorgesehen als schriftlicher Bescheid der IPEA gilt, so wird der Anmelder aufgefordert, bei der IPEA vor Ablauf von 3 Monaten ab dem Tag, an dem das Formblatt PCT/ISA/220 abgesandt wurde oder vor Ablauf von 22 Monaten ab dem Prioritätsdatum, je nachdem, welche Frist später abläuft, eine schriftliche Stellungnahme und, wo dies angebracht ist, Änderungen einzureichen.

Weitere Optionen siehe Formblatt PCT/ISA/220.

**3. Nähere Einzelheiten siehe die Anmerkungen zu Formblatt PCT/ISA/220.**

Name und Postanschrift der mit der Internationalen  
Recherchenbehörde



Europäisches Patentamt  
D-80298 München  
Tel. +49 89 2399 - 0 Tx: 523656 epmu d  
Fax: +49 89 2399 - 4465

Bevollmächtigter Bediensteter

Schmidt, C.  
Tel. +49 89 2399-2254



**SCHRIFTLICHER BESCHEID DER  
INTERNATIONALEN RECHERCHEBEHÖRDE**

Internationales Aktenzeichen  
PCT/EP2005/000319

**Feld Nr. I Grundlage des Bescheids**

1. Hinsichtlich der **Sprache** ist der Bescheid auf der Grundlage der internationalen Anmeldung in der Sprache erstellt worden, in der sie eingereicht wurde, sofern unter diesem Punkt nichts anderes angegeben ist.

Der Bescheid ist auf der Grundlage einer Übersetzung aus der Originalsprache in die folgende Sprache erstellt worden, bei der es sich um die Sprache der Übersetzung handelt, die für die Zwecke der internationalen Recherche eingereicht worden ist (gemäß Regeln 12.3 und 23.1 b)).

2. Hinsichtlich der **Nucleotid- und/oder Aminosäuresequenz**, die in der internationalen Anmeldung offenbart wurde und für die beanspruchte Erfindung erforderlich ist, ist der Bescheid auf folgender Grundlage erstellt worden:

a. Art des Materials

Sequenzprotokoll  
 Tabelle(n) zum Sequenzprotokoll

b. Form des Materials

in schriftlicher Form  
 in computerlesbarer Form

c. Zeitpunkt der Einreichung

in der eingereichten internationalen Anmeldung enthalten  
 zusammen mit der internationalen Anmeldung in computerlesbarer Form eingereicht  
 bei der Behörde nachträglich für die Zwecke der Recherche eingereicht

3.  Wurden mehr als eine Version oder Kopie eines Sequenzprotokolls und/oder einer dazugehörigen Tabelle eingereicht, so sind zusätzlich die erforderlichen Erklärungen, daß die Information in den nachgereichten oder zusätzlichen Kopien mit der Information in der Anmeldung in der eingereichten Fassung übereinstimmt bzw. nicht über sie hinausgeht, vorgelegt worden.

4. Zusätzliche Bemerkungen:

**SCHRIFTLICHER BESCHEID DER  
INTERNATIONALEN RECHERCHEBEHÖRDE**

Internationales Aktenzeichen  
PCT/EP2005/000319

**Feld Nr. V Begründete Feststellung nach Regel 43bis.1(a)(i) hinsichtlich der Neuheit, der  
erfinderischen Tätigkeit und der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur  
Stützung dieser Feststellung**

**1. Feststellung**

Neuheit	Ja: Ansprüche Nein: Ansprüche 1-10
Erfinderische Tätigkeit	Ja: Ansprüche Nein: Ansprüche 1-10
Gewerbliche Anwendbarkeit	Ja: Ansprüche: 1-10 Nein: Ansprüche:

**2. Unterlagen und Erklärungen:**

**siehe Beiblatt**

**Zu Punkt V**

**Begründete Feststellung hinsichtlich der Neuheit, der erfinderischen Tätigkeit und  
der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser  
Feststellung**

Es wird auf die folgenden Dokumente verwiesen:

- D1: SHIMADA M ET AL: "Melanin and blood concentration in a human skin model studied by multiple regression analysis: Assessment by Monte Carlo simulation" September 2001 (2001-09), PHYSICS IN MEDICINE AND BIOLOGY, VOL. 46, NR. 9, PAGE(S) 2397-2406, XP002325296 ISSN: 0031-9155
- D2: US 2003/223060 A1 (GRAF JOHN FREDERICK ET AL) 4. Dezember 2003 (2003-12-04)
- D3: US-A-5 717 605 (KOMIYA ET AL) 10. Februar 1998 (1998-02-10)
- D4: DE 196 52 885 A1 (BASF COATINGS AG, 48165 MUENSTER, DE) 25. Juni 1998 (1998-06-25)

---

- 1. Die vorliegende Anmeldung erfüllt nicht die Erfordernisse des Artikels 33(1) PCT, weil der Gegenstand des Anspruchs 1 im Sinne von Artikel 33(2) PCT nicht neu ist.

Dokument D1 offenbart (die Verweise in Klammern beziehen sich auf dieses Dokument) ein Verfahren zur Bestimmung der Farbwirkung von streuenden Materialien wie biologischen Substanzen (human skin) eines Mehrschichtsystems (multi-layered structure) wobei mittels Monte-Carlo-Simulationen (Abschnitt 2.2) auf der Basis intrinsischer optischer Parameter die Remission berechnet wird.

In D1 unter Abschnitt 2.2 werden die Parameter genau angegeben; diese sind die gleichen wie im Anspruch 1 definiert.

Somit offenbart D1 ein Verfahren mit allen Merkmalen des Anspruchs 1.

- 2. Es wird in diesem Zusammenhang auch auf Dokument D2 verwiesen. D2 offenbart auch ein Verfahren zur Bestimmung der Farbwirkung von streuenden Materialien, in

dem Fall von z.B. Kunststoff, Farben, Textilien (Abschnitt [0002]). Auch in D2 sind Mehrschichtsystemen explizit angesprochen, (Abschnitt [0022,0033] und für diese wird eine Monte-Carlo-Simulation durchgeführt, wobei auch hier die intrinsischen optischen Parametern, wie Absorption, Streuung, Dicke, Brechungsindex usw. verwendet werden.

3. Die abhängigen Ansprüche enthalten keine Merkmale, die in Kombination mit den Merkmalen irgendeines Anspruchs, auf den sie sich beziehen, die Erfordernisse des PCT in bezug auf Neuheit bzw. erfinderische Tätigkeit erfüllen:

**Ansprüche 2 und 3:** auch im Stand der Technik werden sowohl spektrometrischen Messungen als auch Datenbanken verwendet.

**Ansprüche 4-7:** insbesondere in D1 wird explizit auf die Verwendung einer inversen Monte-Carlo-Simulation eingegangen (Abschnitt 2.2). Die Übertragung derartige Simulationen auch auf andere Materialien, wie z.B. dentalen Werkstoffen, wäre somit im Hinblick auf D2 naheliegend.

**Ansprüche 8-10:** auch in D1 und D2 wird die Remission für die Farbwirkung benutzt; die Verwendung von weiteren Algorithmen ist auch aus den Dokumenten bekannt.